



TITLE:

表面電子状態の分子軌道論的取り扱い(「表面電子系の理論」報告,基研短期研究会)

AUTHOR(S):

工藤, 隆雄

CITATION:

工藤, 隆雄. 表面電子状態の分子軌道論的取り扱い(「表面電子系の理論」報告,基研短期研究会). 物性研究 1976, 26(3): C35-C36

ISSUE DATE:

1976-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89195>

RIGHT:

$$N_{\perp}^{-1} \sum_{k_z} \delta(E - E_{\perp}(k_z)) = (\Gamma/\pi) / (E^2 + \Gamma^2)$$

$$V_i(\mathbf{k}) = (N_{\parallel} N_{\perp})^{-1/2} \nu \exp(i \mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{R}_i)$$

パラメーター Δ_{\parallel} , Γ は金属の d バンドの中から, 又 ν は $\theta \rightarrow 0$ での吸着熱の値から決定する。研究会では H/W(100) 及び K/W(110) 系の計算結果を報告し, 更に局在スピンの存在する様な状態についての議論を行ったが, 詳細は別の機会に譲る。⁵⁾

参 考 文 献

- 1) J. R. Schrieffer and P. Soven: Physics Today, April (1975) 24.
- 2) T. L. Einstein and J. R. Schrieffer: Phys. Rev. B7 (1973) 3629
- 3) T. B. Grimley; Proc. Phys. Soc. 90 (1967) 751.
T. B. Grimley and S. M. Walker: Surface Sci. 14 (1969) 395.
- 4) D. M. Newns: Phys. Rev. 178 (1969) 1123.
- 5) M. Tsukada, to be published.

表面電子状態の分子軌道論的取り扱い

日大文理(化) 工 藤 隆 雄

K・K・R. 法等の精密な理論を用いて, 対称性の大きく破れる表面での現象を扱うのは困難なことから, L・C・A・O. 近似の再検討をし, 表面現象の取り扱いを試みた。

まず糸の ℓ 番目原子に注目し, 近傍原子よりの影響は Mattheiss の方法に依って取り入れるものとする。ハミルトニアンは近似的に,

$$h_{\ell} \equiv h_{\ell}^0 + \Delta h_{\ell}$$

$$h_{\ell}^0 = -\Delta_1 + \left(-\frac{2Z_{\ell}}{R_{\ell}} + V_{\ell}\right) + \sum_{\ell'} \left[-\frac{2Z_{\ell'}}{R_{\ell'}} + V_{\ell'}\right]_{\ell}^0 - 6\alpha \left[\frac{3}{8\pi}(\rho_{\ell} + \Delta\rho_{\ell})\right]^{1/3}$$

$$\Delta h_l = \sum_{l'} \left\{ \left(-\frac{2Z_{l'}}{R_{l'}} + V_{l'} \right) - \left[-\frac{2Z_{l'}}{R_{l'}} + V_{l'} \right]_l^0 \right\}$$

と表わされる。ここに Δh_l は近傍原子の作用の非球対称成分を表わす。

続いて系の波動関数は h_l^0 の固有関数を用いて近似する。

$$h_l^0 \phi_l^i = \epsilon_l^i \phi_l^i$$

$$\therefore u_i = \sum_l C_l^i \phi_l^i$$

展開係数は永年方程式,

$$\sum_l \sum_m C_l^{i*} C_m^i [(\epsilon_l^i - \epsilon_i) S_{lm} + O_{lm}] = 0$$

$$S_{lm} = \int \phi_l^{i*} \phi_m^i d\tau, \quad O_{lm} = \int \phi_m^{i*} \Delta h_l \phi_l^i d\tau$$

と u_i の規格直交条件より決まる。又積分は、必要ならば、Löwdin の α 展開を用いて求めることができる。

テストとして、リチウム金属の 2s エネルギーバンドの計算を試みた。しかし最近接原子との重なり積分が約 0.7 にもなり、規格化定数が零となるなどの不都合が見出され、具体的問題を扱うには、多分に検討の余地のあることが見出された。